

文章编号: 1006-9941(2007)01-0019-04

核辐射效应对炸药分解影响的模拟

杨 杰, 过惠平, 王 冬, 李如松

(第二炮兵工程学院, 陕西 西安 710025)

摘要: 利用 MCNP 程序对核模型内部的中子和 γ 两种辐射效应进行了计算, 并深入分析了射线导致炸药分解的过程, 认为射线通过激发产生的大量高能次级电子可导致炸药内部的分子键断裂而分解。为了简化计算, 文中提出了四条假设: (1) 射线对炸药的作用主要是使其分子键断裂; (2) 射线主要使炸药发生第一级分解反应; (3) 炸药分解是匀速的; (4) 射线在炸药中的能量沉积全部使炸药分解。通过这四条假设以及文中对辐射强度的适当放大, 得到了一个放大的分解速率。计算结果表明, 炸药的分解速率不大于 $10^{-9} \text{ mol} \cdot \text{a}^{-1}$, 因此, 认为核辐射效应对炸药分解的影响虽可以忽略不计, 但辐射效应会导致弹头升温可能会间接地对炸药热分解产生重要影响。

关键词: 原子核物理学; 辐射效应; 核弹头; MCNP 程序; 炸药分解

中图分类号: TJ91; O57

文献标识码: A

1 引 言

核装置在整体贮存过程中, 炸药的安全性是一个很重要的问题。第一, 炸药必须能可靠地起爆, 即不会出现失效的情况; 第二, 炸药不会由于一些因素, 比如热量沉积而爆炸, 即炸药必须有较高的安全性; 第三, 炸药在贮存期间不会出现威力减小的情况, 即炸药必须有很低的分解率。

核装置内部存在大量的核材料, 炸药长时间受到核辐射的影响, 在贮存期内, 炸药是否会由于辐射作用而出现大量的分解是一个需要关心的问题。

核装置内部炸药失效的机理比较复杂, 目前关于辐射效应对炸药的影响国内外还没有公开的文献报导, 本文对文献[1]所给出的模型进行了模拟计算, 通过理论分析提出了四条假设, 例举了四种模型、三种炸药的计算结果, 认为, 炸药不会由于与中子、 γ 射线发生作用而在贮存期间发生大量的分解, 但弹头内部的 α 、 β 辐射对金属材料有很强的加热效应进而间接影响炸药的分解速率, 因此在实际贮存过程中应该注意对弹头的散热。

2 理论分析

射线对炸药的影响可以分为两种情况: 第一, 射线穿过炸药产生次级电子, 由于电离效应导致炸药分子键的断裂; 第二, 射线与炸药中的核素发生核反应导致炸

药的组成核素发生改变。由于炸药分子组成元素的核反应截面很小, 因此第二种效应远远弱于第一种效应。因此本文假设射线只会使炸药分子键断裂。

炸药的分解与多种因素有关, 在应力、热运动等因素的影响下, 最弱的分子键往往最先发生断裂, 即发生第一级分解。初始反应开始后将引发一系列的反应, 并且这一系列反应都是放热反应。在射线的作用区域内, 射线所激发的初级电子能量很高(可达数十万电子伏特), 初级电子与物质进一步作用激发出大量的次级电子, 这些高能电子将直接导致炸药分子的断裂, 从而使炸药发生分解。由于炸药的分子键能相对射线能量而言非常小, 如 C—N 键的能量仅有 0.1608 eV, 因此射线沉积于炸药中的能量将使大量的炸药分子发生分解反应。虽然分解是一个放热反应, 但放热速度较慢, 区域很小, 并且实际贮存中只要散热条件良好, 就不会发生加速分解的情况, 更不会出现热量的堆积^[2,3]。

核装置内部会产生大量的 α 、 β 射线, 但由于其内部存在大量的重金属材料, 因而 α 、 β 射线无法穿过金属材料与炸药发生作用。

根据以上论述, 同时考虑到简化计算, 本文作出如下假设: 第一, 射线与炸药的核反应宏观截面极小, 忽略射线与炸药分子发生的核反应, 即假设射线对炸药的作用主要是使其分子键断裂; 第二, 射线与炸药分子作用只是使其发生第一级分解; 第三, 炸药散热条件良好, 同时忽略炸药的自催化反应以及辐射对炸药安定性影响等因素, 即假设分解反应是匀速的; 第四, 射线沉积于炸药中的能量全部使炸药分解。显然基于以上四条假设本文将得到一个放大的分解速率。

收稿日期: 2006-05-19; 修回日期: 2006-07-06

作者简介: 杨杰(1982-), 男, 硕士研究生, 从事辐射防护研究。

e-mail: yangjie_vv321@sina.com

3 理论计算思路

在计算辐射效应对炸药的影响时,炸药的分解速率与多种因素有关,首先是单个射线在炸药中的能量沉积,其次是射线的强度,炸药的活化能等。在本文的假设条件下,炸药的分解率等于总的能量沉积除以炸药的活化能,进而推导出炸药的分解速率,可用公式(1)来表示。

$$v = (I_n E_n + I_p E_p) / E_0 \quad (1)$$

式中, v 为炸药的分解速率,单位为 $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$; I_n 、 I_p 分别为中子和 γ 的强度,单位为 Bq ; E_n 、 E_p 分别为一个中子和 γ 在炸药中的平均能量沉积,单位为 J ; E_0 为炸药的活化能,单位为 $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

从公式(1)可以看出,炸药的分解速率与中子、 γ 的强度及其在炸药中的能量沉积率有关,还与炸药的活化能有关。射线的强度越高,炸药的活化能越小,炸药的分解速率越大。

文献[4~6]所提到的核装置模型组成如下:中心为一空心球,被武器级铀(WgU)和武器级钚(WgPu)所包围,由内往外依次为铍反射层、贫化铀或钨反射层、高能炸药层和铝壳。依据文献[1]和文献[7],本文将裂变芯和贫化铀的表面中子、 γ 出射率分别均放大为 10^6 Bq ,显然根据公式(1)计算炸药的分解速率时本文仍将得到一个进一步放大的分解速率。

根据文献[1],对于中子与 γ 的辐射效应的计算,本文采用了具有强大计算功能的MCNP软件模拟射

线对炸药的辐射效应。MCNP程序是由Los Alamos国家实验室研制的一个大型、多功能的粒子运输蒙特卡罗程序,可计算任意三维复杂几何系统内的中子、光子、电子或中子-光子-电子耦合运输问题,还可计算临界系统的多种本征值问题。MCNP程序具有超强的几何处理能力,几何系统由几何块组成,几何块的界面由平面、二次曲面及特殊的四次椭圆环曲面组成^[8]。

利用MCNP程序模拟这个基本模型,可以计算裂变芯和反射层所发射的中子与 γ 在运输过程中在高压炸药层中的能量沉积率。利用公式(1)结合表1、表2和表3中的相关数据进行计算可以得到对于不同炸药在不同核弹头模型中的分解速率。

程序中所模拟的各种材料及其组成见表1。

表1 计算模型核材料的组成^[1,6]

Table 1 The composition of nuclear materials in calculation model

WgU	^{234}U 1.0%, ^{235}U 93.3%, ^{238}U 5.5%
PoorU	^{234}U 0.2%, ^{235}U 0.4%, ^{238}U 99.4%
WgPu	^{238}Pu 0.005%, ^{239}Pu 93.3%, ^{240}Pu 6.0%, ^{241}Pu 0.44%, ^{242}Pu 0.013%

由于核装置内部同时存在中子与 γ 两种辐射,而且在模型1与模型3中同时存在裂变芯与贫化铀两种放射性物质,因此利用MCNP模拟中子和 γ 输运时,采用了先计算中子的辐射效应后计算 γ 的辐射效应,先计算裂变芯的辐射效应后计算贫化铀的辐射效应,最后将计算结果相叠加,将叠加的结果作为射线在炸药中的能量沉积率。

表2 模拟计算的基本结构模型^[1]

Table 2 The model of basic structure of simulation calculation

model 1 WgU + poor U		model 2 WgU + W		model 3 WgPu + poor U		model 4 WgPu + W		
external diameter/cm	mass /kg	external diameter/cm	mass /kg	external diameter/cm	mass /kg	external diameter/cm	mass /kg	
cavity	5.77	0	cavity	5.77	0	cavity	4.25	0
WgU	7	12	WgU	7	12	WgPu	5	4
Be	9	3	Be	9	3	Be	7	2
poor U	12	79	W	12	81	poor U	10	52
explosive	22	71	explosive	22	71	explosive	20	56
Al	23	17	Al	23	17	Al	21	14
total mass	182		total mass	184		total mass	128	
						total mass	129	

对于表2中高能炸药的类型,本文在计算中采用了文献[9]中三种比较有代表性的炸药(见表3)。计算这三种炸药分别填充四种模型后的分解速率。

表3中三种炸药HMX、TNAZ、NTO,它们具有较高的安全性,其自然分解率极小,同时它们具有较大的威力。

从表3中可以看出3种炸药的活化能大致相等,都约为C—C键或C—N键的键能,可以认为它们的第一级分解开始于C—C键或C—N键的断裂,同时几种炸药的其它性质差别不大,说明它们与射线作用的机理是相同的,即它们都是由于射线与物质发生相互作用时所

产生的高能次级电子作用下而发生分子键的断裂。

从这个分解机理出发,同时考虑到其它高能炸药的组成核素以及反应截面等性质差别不大,因此其它高能炸药的计算结果与表 3 中炸药的计算结果也不会有很大的差别,即表 3 中的炸药具有一定的代表性。

表 3 几种炸药的性质^[9]

Table 3 The properties of HMX, TNAZ and NTO

explosive	HMX	TNAZ	NTO
molecule	$C_4H_8N_8O_8$	$C_3H_4N_6O_6$	$C_2H_2N_4O_3$
M	296.17	256	130.06
$E/kJ \cdot mol^{-1}$	220.5	194.8	186.0
$\rho/g \cdot cm^{-3}$	1.905	1.5	1.93

通过 MCNP 程序计算得到射线能量在三种炸药中的沉积 E_n 、 E_p , 比较三种炸药的活化能, 同时结合本文提出的几条假设, 利用公式(1)得出炸药的分解速率。

4 仿真结果与讨论

利用表 1~3 所给出的数据, 通过 MCNP 对三种炸药在四种模型进行计算, 并结合公式(1)得到结果见表 4。同时计算表明模型中一个中子所引起炸药分子分解的数量比一个 γ 所引起炸药分子分解的数量要大约两个数量级, 可见中子具有较强的辐射效应, 这可能是由于中子与炸药的反应截面大, 而 γ 与炸药的反应截面小, 而且 γ 在重金属中的自吸收很严重导致 γ 与炸药作用的截面远远小于中子与炸药反应的截面。

表 4 四种模型中不同炸药分解率

Table 4 The decomposition rate of different explosives in the four models

explosive	HMX	TNAZ	NTO
model 1	1.6416×10^{-9}	1.4988×10^{-9}	1.5627×10^{-9}
model 2	1.0382×10^{-9}	9.7255×10^{-10}	1.0395×10^{-9}
model 3	2.1363×10^{-9}	1.9451×10^{-9}	2.0412×10^{-9}
model 4	1.4351×10^{-9}	1.3369×10^{-9}	1.4234×10^{-9}

从表 4 中可以看出在四种模型辐射效应中, 三种炸药的分解速率都很低(都在 $10^{-9} mol \cdot a^{-1}$), 考虑到本计算得到的是经过放大过的速率, 因此三种炸药的分解速率应该低于 $10^{-9} mol \cdot a^{-1}$ 的量级, 即每分解 1 mol 炸药需要至少 10^9 年! 本文认为导致辐射效应对炸药分解影响小的原因是多方面的, 第一, 炸药的质量较小、密度较小导致宏观截面很小, 中子和 γ 在炸药中的能量沉积率很小; 第二, 中子的电离效应太弱, 中子与炸药内部的核素反应以弹性碰撞为主, 中子经过一次碰撞是不会

损失全部能量的, 因而在中子穿过炸药的过程中能产生的次级电子有限; 第三, 裂变芯发出的 γ 经过两个反射层后强度大为减弱, 同时 γ 与轻核元素反应截面也导致 γ 在炸药中所产生的次级电子有限。

通过计算结果和以上分析可知, 在实际弹头贮存过程中不需要考虑弹头内部辐射效应对炸药的影响。但是核装置内部的裂变材料也存在着较强的 α 与 β 的辐射效应, α 与 β 射线的能量会全部在弹头内部沉积, 因而它们会对弹头内部产生较强的加热效应, 因此应该注意加强对弹头的散热, 除静电措施, 以免产生炸药分解加速的情况。

5 结论

对四种模型的计算表明, 核辐射效应对炸药分解率的影响是极低的, 甚至是可以忽略的, 这对以后分析核装置内部炸药失效的原因具有很大的现实意义。本文只考虑了中子与 γ 对炸药分解的影响, 因为实际上 α 与 β 射线的射程短容易被吸收, 而且炸药与放射性材料事实上没有直接的接触, 所以 α 与 β 射线对炸药的分解率没有直接的影响。但是 α 与 β 射线的热效应是很明显的, 它可能导致炸药分解加速, 因此应该重视弹头在贮存过程中的散热。

通过对四种模型的计算, 本文可以得出如下结论, 对于不同的炸药和不同的模型, 炸药的辐射分解率是极低的, 小于 $10^{-9} mol \cdot a^{-1}$, 换言之, 通过辐射效应分解 1 mol 炸药需要大于 10^9 年, 因此核内部炸药的分解因素可以忽略其辐射效应。但同时也应注意到由于辐射引起整个弹头的热效应是不可小视的, 因此弹头在贮存过程中的散热应该引起重视。

参考文献:

- [1] 陈波, 郝樊华, 龚建. 核弹头模型的 γ 射线探测[J]. 核电子学与探测技术, 1996, 16(4): 419-422.
CHEN Bo, HAO Fan-hua, GONG Jian. Detecting γ rays in nuclear model[J]. Nuclear Electronic Science and Detecting Technique, 1996, 16(4): 419-422.
- [2] 吴治华, 赵国庆, 陆福全, 等. 原子核物理实验方法[M]. 北京: 原子能出版社, 1996.
WU Zhi-hua, ZHAO Guo-qing, LU Fu-quan, et al. Nuclear Physics Experiment Method[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1996.
- [3] 徐更光. 炸药性能与应用[M]. 北京: 北京工业出版, 1986.
XU Geng-guang. Explosive Property and Application[M]. Beijing: Beijing Industry Publishing Company, 1986.
- [4] Steve Fetter, Valery A Frolove. Fissile materials and weapon models [J]. Science & Global Security, 1990, 1: 422.
- [5] Steve Fetter, Valery A Frolov. Detecting nuclear warheads[J]. Science

- & *Global Security*, 1990, 1: 225 - 290.
- [6] Frankvon Hippel, Sagdeev Z. Reserving the arms race[J]. *Gordon and Breachscience Publishers*, 1992.
- [7] 伍钧, 张本爱, 沈姚崧, 等. 用缓发中子探测核弹头的技术探索[J]. *核技术*, 2004, 27(4): 317 - 320.
WU Jun, ZHANG Ben-ai, SHEN Yao-song, et al. The technique explore of using delaying neutron detecting nuclear warhead [J]. *Nuclear Science*, 2004, 27(4): 317 - 320.
- [8] Judith F Briesmeister. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code Version 4B[M]. 1997, 3.
- [9] 王新锋, 舒远杰. 新型高能炸药热分解研究进展[J]. *化学研究与应用*, 2004, 16(3): 305 - 308.
WANG Xin-feng, SHU Yuan-jie. Progress in studies on thermal decomposition of new high explosives [J]. *Chemical Research and Application*, 2004, 16(3): 305 - 308.

Simulation of the Effect of Radiation on Explosive Decomposition

YANG Jie, GUO Hui-ping, WANG Dong, LI Ru-song

(The Second Artillery Engineering College, Xi'an 710025, China)

Abstract: MCNP program was used to simulate the radiation in the nuclear warhead model and calculate the effect of neutron and γ rays on the explosive decomposition. High energy secondary electrons activated by the rays made the molecular bond of the explosive broken and decomposed. To calculate concisely, four hypotheses were given (1) the result from the action of rays causes the break of the explosive molecular bond; (2) the rays make the explosive decomposed in first order mainly; (3) the speed of explosive decomposition is uniform; (4) the total energy of which the rays left in the explosive makes the explosive decomposed. Through the four hypotheses and the amplifier of radiation intensity, a larger decomposition velocity was obtained. The results show that the decomposition velocity is not more than $10^{-9} \text{ mol} \cdot \text{a}^{-1}$, and the explosive decomposition caused by the radiation of nuclear warhead can be neglected, but the radiation affection can make the warhead warm and then affect the explosive decomposition.

Key words: nuclear physics; radiation affection; nuclear warhead; MCNP program; explosive decomposition

(上接 18 页)

Preparation of RDX /SiO₂ Nanocomposite Energetic Materials by Sol-Gel Method

CHI Yu, HUANG Hui, LI Jin-shan, ZENG Gui-yu

(Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China)

Abstract: The xerogel and aerogel RDX/SiO₂ nanocomposite energetic materials were prepared using sol-gel method. TEM and XRD were used to analyze the surface topography and the crystal structure. The thermal decomposition and the impact sensitivity for RDX/SiO₂ nanocomposites were also tested. The results show that compared with pure RDX, the DSC decomposition peak temperature of the aerogel RDX/SiO₂ containing 45% RDX decreases by 15.4 °C. The xerogel framework can effectively desensitize RDX, and the impact sensitivity decreases greatly with the increase of the SiO₂ framework content.

Key words: physical chemistry; sol-gel; RDX/SiO₂; thermal decomposition; impact sensitivity